

# 利用SCIEX高分辨液质系统对不同配方纯生啤酒的品质差异研究

## Application of a non-targeted metabolomics approach to study the quality difference of draft beers

陈慧敏, 杨总, 刘冰洁, 郭立海

Chen Huimin, Yang Zong, Liu Bingjie, Guo Lihai

SCIEX, China

**Keywords:** Metabolomics; Beer; Nutrients; Flavor substance;

X500R

### 引言

啤酒是一种以麦芽、大米、酒花、酿酒酵母和水为原料,由麦芽发酵后产生的含有二氧化碳气泡的酒精饮料。作为全球第三大饮料,被称为“液体面包”,因其丰富的营养和独特的口感备受喜爱。随着人们生活水平的不断提高和啤酒行业的快速发展,人们对啤酒的营养和风味要求也不断提高。啤酒厂商为了降低啤酒成本和改善风味,会进行不同的工艺和配方改进。因此通过啤酒风味和营养物质的表征可以帮助更好的改进配方工艺。

四极杆飞行时间(QTOF)质谱的灵敏度和选择性鉴定流程正逐步成为啤酒成分鉴定日益需求的一项技术,这项技术克服了传统技术面临的许多挑战,能从分子水平直观、快速、准确地得到啤酒成分的鉴定结果。

本文选择某品牌两种不同配方酿造的纯生啤酒为研究对象,进行啤酒中的风味以及营养物质表征并对比两种啤酒的差异。

### 1、实验条件

质谱系统: SCIEX X500R QTOF系统;

扫描方式: ESI+/- TOF MS-IDA-10 TOF MS/MS; 动态背景扣除开启; 扫描范围: 一级m/z 70-2000 Da, 二级m/z 40-2000 Da;

喷雾电压IS: 5500 V/-4500 V      源温度 TEM: 500 °C

气帘气 CUR: 30 psi      碰撞气 CAD: Medium

雾化气 GS1: 50 psi      辅助气 GS2: 50 psi



SCIEX X500R QTOF 系统

### 2、快速样品前处理

取纯生啤酒样本2 mL, 在15000 rpm条件下离心10 min, 转入样品瓶, 待LC-MS/MS上机测定。质控样本(QC)为18个样本(9个A啤酒和9个B啤酒样本)等比例混合。

### 3、数据分析策略

#### 3.1 SCIEX OS软件帮助快速鉴定啤酒成分

利用SCIEX X500R QTOF系统对QC进行正离子模式和负离子模式分别一针进样便可以获得全面一级二级信息,用于准确性。结合高质量二级谱库,利用SCIEX OS软件通过一级质量精度、同位素分布和二级库匹配快速进行化合物筛查鉴定,红绿灯式筛查结果显示如图1。并且可以呈现详细色谱图积分情况、一级质谱图的同位素丰度比对情况以及二级质谱图与二级谱库中标准品谱图匹配情况,以麦芽五糖为例见图2。

Index	Com... Name	Expect... RT	Area	Reten... Time	Ret Ti	Adduct / Char...	Formula	Precur... Mass	“红绿灯式”快速筛选结果			一级质量偏差 <2ppm		与二级谱库匹配得分	
									Mass Error...	Isoto... Conf...	Library Conf...	Found At Mass	Mass Error (...)	Library Hit	Library Score
182	糊精	0.80	3.002e6	0.80	0.00	[M-H]-	C18H32O16	503.1618	✓	✓	✓	503.1623	1.0	Maltotriose [...]	95.7
183	麦芽三糖	0.80	3.002e6	0.80	0.00	[M-H]-	C18H32O16	503.1618	✓	✓	✓	503.1623	1.0	Maltotriose [...]	95.7
184	麦芽四糖	0.76	2.622e6	0.79	0.03	[M-H]-	C24H42O21	665.2146	✓	✓	✓	665.2153	1.0	Maltotetraos...	79.6
▶ 185	麦芽五糖	0.76	1.080e6	0.77	0.01	[M-H]-	C30H52O26	827.2674	✓	✓	✓	827.2684	1.2	麦芽五糖 Malt...	97.9
186	麦芽六糖	0.75	6.569e5	0.76	0.01	[M-H]-	C36H62O31	989.3202	✓	✓	✓	989.3209	0.7	麦芽六糖 Malt...	85.4
187	异麦芽糖	0.81	2.317e6	0.81	0.00	[M-H]-	C12H22O11	341.1089	✓	✓	✓	341.1091	0.5	Melibiose [S...	96.0
188	D-葡萄糖	0.81	1.385e6	0.82	0.00	[M-H]-	C6H12O6	179.0561	✓	✓	✓	179.0559	-1.1	D-葡萄糖 D-G...	92.2

图1. 红绿灯式筛查结果显示

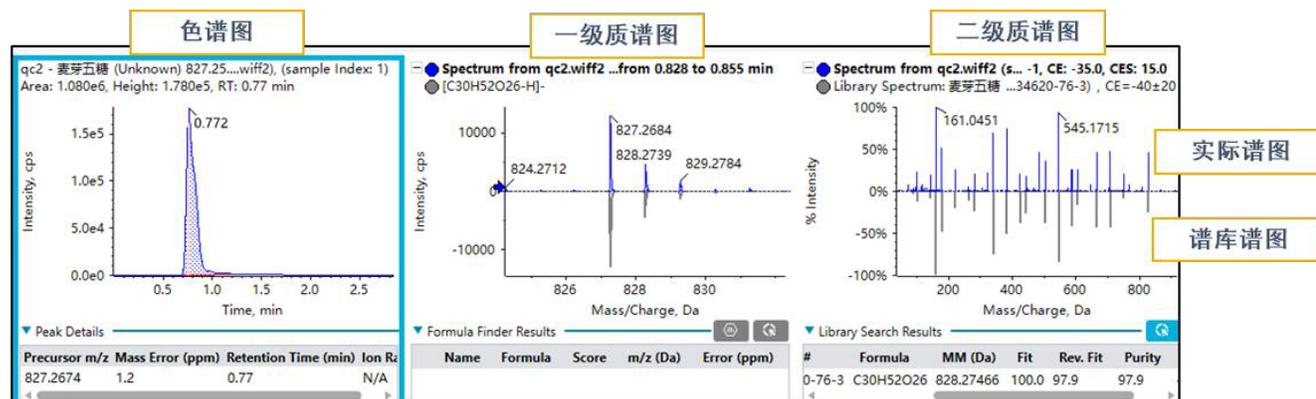


图2. 麦芽五糖色谱图、一级质谱图和二级质谱图

除了二级谱库以外，可以利用Chemspider进行未知物结构确认，以啤酒花代表性成份蛇床酮（啤酒花β酸）的鉴定为例。蛇床酮对应母离子的提取色谱峰一级质量偏差 < 1 ppm, Formula Finder自动预测分子式也为C<sub>26</sub>H<sub>38</sub>O<sub>4</sub>, 可自动链接Chemspider网站给出目标分子式对应的可能化合物及结构式并进行碎片归属。

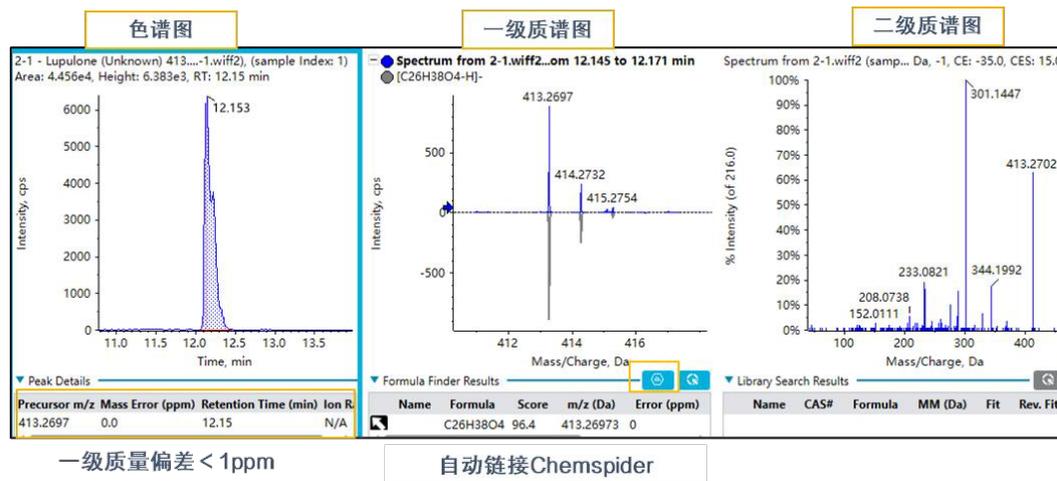


图3. 蛇床酮对应的色谱图、一级质谱图和二级质谱图

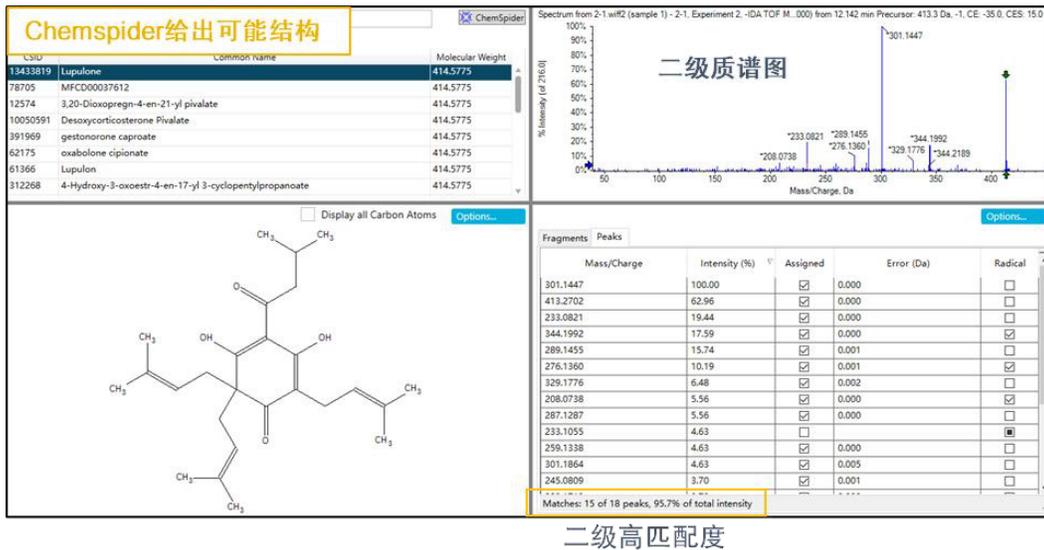


图4. 分子式 C<sub>26</sub>H<sub>38</sub>O<sub>4</sub>的ChemSpider检索结果及可能结构的碎片解析

### 3.2 代谢组学鉴定结果及差异分析

结合SCIEX代谢物数据库和天然产物数据库以及其他数据库鉴定到两种纯生啤酒中共361个化合物，覆盖种类包括有机酸、氨基酸及肽、糖以及核苷酸等（图5）。利用P-value < 0.05、Fold-Change > 1.2（图6）和VIP > 1筛选差异化合物，最终得到75个差异成分，其中42个化合物纯生啤酒A中含量更高，33个化合物纯生啤酒B中含量更高。

从营养成分种类来看，啤酒B中氨基酸及肽类相关和树脂类含量更高，啤酒A中部分黄酮类和糖类含量更高。图7为类蛇床酮和亚叶酸两种啤酒中含量差异的箱状图。类蛇床酮属于啤酒花的β酸，苦味较细腻爽口，具有防腐并改善啤酒泡沫稳定性作用，在啤酒B中含量更高。亚叶酸属于维生素B9的一种形式，是一种营养物质，在啤酒A中含量更高。啤酒中成份差异与口感和营养品质相关联，可以通过分子水平的含量高低结合感官对啤酒品质进行更全面的评估。

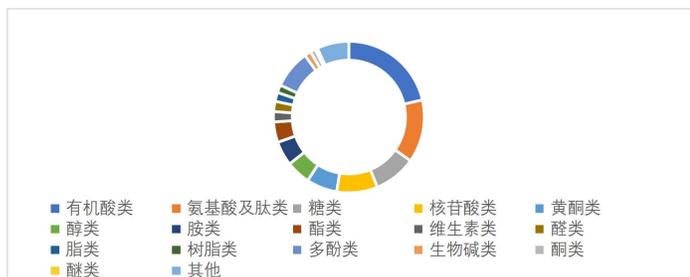


图5. 纯生啤酒中小分子化合物鉴定结果及分类

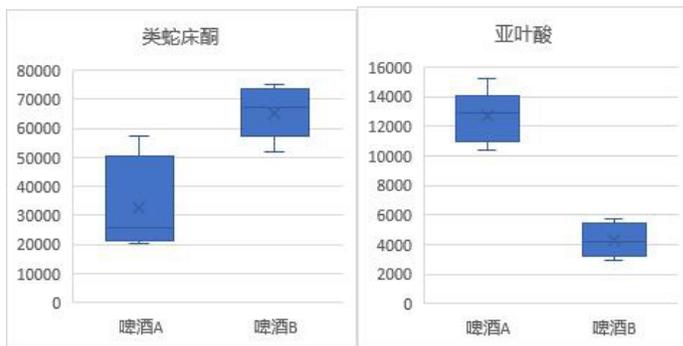
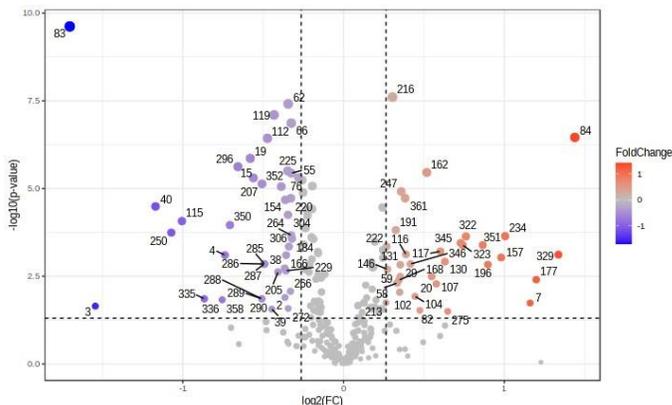


图7. 两种啤酒样本中类蛇床酮和亚叶酸含量变化箱状图

## 4、总结

本文使用SCIEX X500R QTOF系统建立了纯生啤酒非靶向代谢组学方法。X500R具有超快的扫描速度，且兼顾灵敏度和分辨率，一针进样即可得到复杂基质样品中待测物的全面的高质量一级与二级质谱数据，且一级质量精度均小于2 ppm。利用SCIEX OS软件以及相关数据库配合一级质谱、同位素分布和二级质谱图可快速准确地提供定性结果。X500R QTOF系统采集的数据保证得到全面丰富的鉴定结果，通过进行啤酒风味和营养成分鉴定帮助啤酒配方工艺的改进研究。

SCIEX临床诊断产品线仅用于体外诊断。仅凭处方销售。这些产品并非在所有国家地区都提供销售。获取有关具体可用信息，请联系当地销售代表或查阅<https://sciex.com.cn/diagnostics>。所有其他产品仅用于研究。不用于临床诊断。本文提及的商标和/或注册商标，也包括相关的标识、标志的所有权，归属于AB Sciex Pte. Ltd. 或在美国和/或某些其他国家地区的各权利所有人。

© 2024 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. RUO-MKT-02-15933-ZH-A



### SCIEX中国

北京分公司  
北京市朝阳区酒仙桥中路24号院  
1号楼5层  
电话：010-5808-1388  
传真：010-5808-1390  
全国咨询电话：800-820-3488, 400-821-3897

上海公司及中国区应用支持中心  
上海市长宁区福泉北路518号  
1座502室  
电话：021-2419-7201  
传真：021-2419-7333  
官网：[sciex.com.cn](http://sciex.com.cn)

广州办公室  
广州国际生物岛星岛环北路1号  
B2栋501、502单元  
电话：020-8842-4017

官方微信：[SCIEX-China](#)